

科学仪器原创作品大赛专题

doi: 10.12452/j.fxcsxb.26012402

编者按：科学仪器原创作品大赛是仪器信息网最大型的线上行业活动，自2008年创办以来，已成功举办18届。大赛秉持“促进产业技术交流，提高仪器应用水平和研发能力”的宗旨，深耕科学仪器及检测领域，为行业从业者搭建起专业、开放的交流与展示平台。赛事覆盖食品检测、环境监测、生命分析等十余大测试领域，征集仪器应用、方法探索、技术研发等多类原创作品，行业影响力突出。历届累计参赛作品超20000篇，为促进科技创新和加强学术交流，共推行业高质量发展做出了重要贡献。

为及时向学界和产业界推介大赛优秀成果，本刊联合仪器信息网特别策划了“科学仪器原创作品大赛专题”系列，以促进学术交流与技术推广。自本期起，专题将陆续刊出，敬请广大读者关注！

近红外光谱结合机器学习对当归及其相似品的准确鉴别

张露文¹，刘雨¹，谢佳琦¹，王必成¹，卞希慧^{1,2,3*}

(1. 天津工业大学 化学工程与技术学院，天津 300387；2. 宜宾学院，过程分析与控制四川省高校重点实验室，四川 宜宾 644000；3. 天津工业大学 药学院，天津 300387)

摘要：该研究采用近红外光谱技术结合机器学习方法对当归及其4种相似品(独活、川芎、白术和白芷)进行鉴别。共采集来自不同地区的191个样品，获取其近红外光谱数据。首先采用主成分分析进行无监督可视化分析，并采用簇类独立软模式、偏最小二乘-判别分析、反向传播-人工神经网络、随机森林、卷积神经网络和极限学习机共6种机器学习方法建立鉴别模型。使用混淆矩阵、召回率、精确率、F1分数和准确率对模型性能进行评价。结果表明，主成分分析得分图未能实现5种中药材的有效区分。在6种机器学习模型中，极限学习机模型在准确率、召回率和F1分数等指标上表现最佳，预测集准确率达到100%，明显优于其他模型。因此，近红外光谱技术结合极限学习机可以实现当归及其4种相似品的准确鉴别。

关键词：当归；鉴别分析；近红外光谱；化学模式识别；机器学习

中图分类号： O657.3；R282 **文献标识码：** A **文章编号：** 1004-4957(2026)04-0673-07

Near-infrared Spectroscopy Combined with Machine Learning for the Accurate Discrimination of Angelicae Sinensis Radix from Its Similar Herbs

ZHANG Lu-wen¹, LIU Yu¹, XIE Jia-qi¹, WANG Bi-cheng¹, BIAN Xi-hui^{1,2,3*}

(1. School of Chemical Engineering and Technology, Tiangong University, Tianjin 300387, China; 2. Key Lab of Process Analysis and Control of Sichuan Universities, Yibin University, Yibin 644000, China; 3. School of Pharmaceutical Sciences, Tiangong University, Tianjin 300387, China)

Abstract: This study employed near-infrared spectroscopy (NIR) combined with machine learning methods to discriminate Angelicae Sinensis Radix from its four similar herbs (Angelicae Pubescentis Radix, Chuanxiong Rhizoma, Atractylodis Macrocephalae Rhizoma, and Angelicae Dahuricae Radix). A total of 191 samples collected from different regions were analyzed, and their NIR spectra were acquired. Principal component analysis (PCA) was first performed for unsupervised visualization. Subsequently, six machine learning models, including soft independent modeling of class analogy (SIMCA), partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA), back propagation-artificial neural network (BP-ANN), random forest (RF), convolutional neural network (CNN), and extreme

收稿日期：2026-01-24；修回日期：2026-02-26

基金项目：过程分析与控制四川省高校重点实验室开放基金(GCFX2024003)；药物制剂技术与评价国家药品监督管理局重点实验室开放课题(2023TREDP01)

*通讯作者：卞希慧，博士，教授，研究方向：化学计量学算法及其在中药、食品、环境等方面的应用，E-mail: bianxihui@163.com

网络首发日期：2026-03-09

learning machine (ELM), were established. Model performance was evaluated using the confusion matrix, recall, precision, F1-score, and accuracy. The results indicated that the PCA score plot failed to effectively discriminate the five herbal medicines. Among the six machine learning models, the ELM model exhibited the best classification performance in terms of accuracy, recall, and F1-score, achieving 100% accuracy on the prediction set and outperforming the other models. Therefore, NIR spectroscopy combined with ELM can accurately discriminate *Angelicae Sinensis Radix* from its four similar herbs.

Key words: *Angelicae Sinensis Radix*; discrimination analysis; near-infrared spectroscopy; chemical pattern recognition; machine learning

当归(*Angelicae Sinensis Radix*, ASR), 作为常用中药材, 其化学成分极为丰富, 涵盖多糖、挥发油、类黄酮、氨基酸以及有机酸等多种活性物质^[1]。凭借这些独特的化学成分, 当归在促进造血功能、减轻炎症反应等方面展现出了显著的药理作用, 尤其在治疗慢性贫血、白血病和糖尿病等疑难病症时^[2], 当归多糖的疗效更是备受瞩目。然而受不同地区环境条件、气候和土壤成分等各种因素影响, 当归的品质高低不齐^[3], 高昂的价格促使一些不法商家, 将目光投向与当归形态相似的独活(*Angelicae Pubescentis Radix*, APR)、川芎(*Chuanxiong Rhizoma*, CR)、白术(*Atractylodis Macrocephalae Rhizoma*, AMR)和白芷(*Angelicae Dahuricae Radix*, ADR)等药材, 试图以假乱真, 获取不正当利益。这些相似药材在外观形态上与当归极为相近, 主要用药部位均为根部, 且气味特征相近^[4]。目前, 当归及其相似品的鉴别主要依赖性状鉴别、显微鉴别及理化分析方法。性状和显微鉴别受经验影响较大, 主观性较强; 理化方法如薄层色谱、高效液相色谱以及气相色谱等, 虽可通过特征成分进行分析, 但通常需要复杂的样品前处理, 检测周期较长, 且具有一定的破坏性^[5-7]。在面对成分复杂、来源多样且相似度较高的中药材时, 传统方法难以实现快速、客观和高通量的鉴别需求。因此, 建立一种快速、无损且高效的鉴别方法具有重要意义。

近红外光谱技术凭借其操作简便、分析速度快、结果准确且对样品无污染、无损耗等优势^[8], 在中药质量评价中得到广泛关注。然而, 近红外光谱数据的复杂性往往需要借助机器学习方法进行特征提取, 以实现更精准鉴别。近年来, 偏最小二乘-判别分析(PLS-DA)、随机森林(RF)、卷积神经网络(CNN)及极限学习机(ELM)等方法在复杂体系的分类识别中表现出良好性能, 但其在中药相似品高精度鉴别中的系统比较研究仍相对不足^[9]。

基于此, 本研究以当归及其4种常见相似品为研究对象, 利用近红外光谱获取样品信息, 首先采用主成分分析(PCA)进行无监督可视化分析, 在此基础上构建簇类独立软模式(SIMCA)、PLS-DA、反向传播-人工神经网络(BP-ANN)、RF、CNN和ELM等多种监督分类模型, 并对其分类准确率、稳定性及建模效率等进行了系统比较, 筛选更适用于中药相似品鉴别的模型, 以为中药的快速、无损鉴别提供更具针对性的技术参考。

1 实验部分

1.1 样品采集与制备

从天津市的40家正规中药店铺采集191个样品, 包括40个当归、39个独活、38个川芎、35个白术和39个白芷。为了便于实验操作, 将191个样品按顺序进行编号, 其中1~40号为当归, 41~79号为独活, 80~117号为川芎, 118~152号为白术, 153~191号为白芷。将样品放置在通风炉中, 60℃恒温干燥至恒重以去除水分。随后, 使用Dade便携式中药粉碎机(温岭市林大机械有限公司)对干燥后的样品进行粉碎处理。为确保样品粒度均匀, 选用120目筛对粉碎后的样品进行过滤。最后, 将所有处理后的粉末样品分别装入60 mm×100 mm的密封袋中, 并妥善保存以备后续实验使用。

1.2 近红外光谱采集

采用SupNIR-2720近红外分析仪(聚光科技股份有限公司)进行样品的光谱信息采集。实验环境温度维持在21℃。接通仪器电源并启动, 首先进行40 min的预热, 以确保光源和检测器的稳定性。随后, 使用仪器内置的标准参比板(聚四氟乙烯白板)对系统进行背景校准, 以消除环境光的干扰。在样品装填过程选用光程为3 mm的玻璃样品杯, 将粉末样品均匀填充至杯内, 避免出现分层或空隙。通过

轻敲样品杯底部，压实粉末并保持表面平整。然后设置光谱采集参数。根据样品特性，将波长范围设定为1 000~1 799 nm，选择单次扫描模式，分辨率设置为3 nm。测量时，将每个装有样品的玻璃样品杯放入样品仓，确保光路垂直照射到粉末表面。最后，启动扫描程序，并实时监测光谱曲线。对于因装样不均等原因导致的异常波动数据(如尖峰)予以剔除，以确保所采集光谱信息的准确性和可靠性。本实验对每个样品均进行3次重复测量，最后取3次的平均光谱数值作为每个样品的最终光谱信息。

1.3 机器学习方法

本研究采用SIMCA、PLS-DA、BP-ANN、RF、CNN和ELM共6种机器学习方法对当归及其4种相似品进行鉴别。SIMCA通过为每个类别构建独立的PCA模型，能够揭示类别间的差异，并实现高效的样品分类^[10-11]。PLS-DA通过将类别标签作为响应矩阵Y，在最大化测量矩阵X与Y协方差的同时提取潜在变量，能够在降维的同时最大化类间差异，适用于多类别样品的分类任务^[12-13]。BP-ANN采用多层结构模拟生物神经元的工作机制，通过调整网络权重提高分类精度，适用于非线性关系建模^[14-15]。RF是一种集成学习方法，通过构建多棵决策树并结合投票机制进行分类，具有较好的鲁棒性，特别适合处理高维、复杂的数据集^[16-17]。CNN作为一种应用最广泛的深度学习方法，能够自动提取数据中的局部特征，适合处理具有空间结构的光谱数据^[18]。ELM则是一种基于单隐层的前馈神经网络算法，通过随机初始化输入层到隐含层的连接权重及隐含层偏置，并采用最小二乘法解析求解输出层权重，从而避免迭代训练过程，显著提高了训练速度和计算效率^[19]。

1.4 数据分组与模型评价

使用Kennard-Stone(KS)算法对样品进行分组，将5类中药样品中的每类按2:1的比例分为训练部分和预测部分。其中，当归、独活、川芎、白术和白芷样品的训练样品和预测样品数分别为27和13、26和13、25和13、23和12以及26和13。将5类的训练部分合并为训练集，共127个样品，预测部分合并为预测集，共64个样品。

为评价不同机器学习模型对5类样品的分类性能，采用混淆矩阵对鉴别结果可视化。混淆矩阵是一种常用来比较预测结果与实际结果之间差异的可视化工具，如图1所示，其中行代表实际类，列代表预测类。 N_{ij} 表示实际属于第*i*类，但被错误分为第*j*类的样品数， N_{jj} 表示正确分类的第*j*类样品数，在混淆矩阵中，对角线上的数越大，表示模型效果越好^[20]。

基于混淆矩阵得到召回率(Recall_{*i*})、精确率(Precision_{*i*})、F1分数(F1-score_{*i*})和准确率(Accuracy)等评价指标，每个指标的数值越大，代表模型性能越好^[21]。其中，召回率、精确率和F1分数分别针对每一类进行计算，而准确率用于评价模型对所有样本整体分类的准确程度。公式如下：

(1) 召回率(Recall_{*i*}):

$$Recall_i = \frac{N_{ii}}{\sum_{k=1}^n N_{ik}} \times 100\% \quad (1)$$

(2) 精确率(Precision_{*i*}):

$$Precision_i = \frac{N_{ii}}{\sum_{k=1}^n N_{ki}} \times 100\% \quad (2)$$

其中，*n*表示类别总数，*k*为类别索引。 N_{ii} 表示被正确分类的第*i*类样品数， $\sum_{k=1}^n N_{ik}$ 表示实际为第*i*类的样品总数， $\sum_{k=1}^n N_{ki}$ 表示被预测为第*i*类的样品总数。

(3) F1分数(F1-score_{*i*}):

		Predicted label		
		S_1	... S_i ...	S_n
True label	S_1	N_{11}	N_{1i}	N_{1n}
	⋮ S_i ⋮	N_{i1}	⋮ N_{ij} ⋮	N_{in}
	S_n	N_{n1}	N_{nj}	N_{nn}

图1 混淆矩阵示意图

Fig. 1 Schematic diagram of a confusion matrix

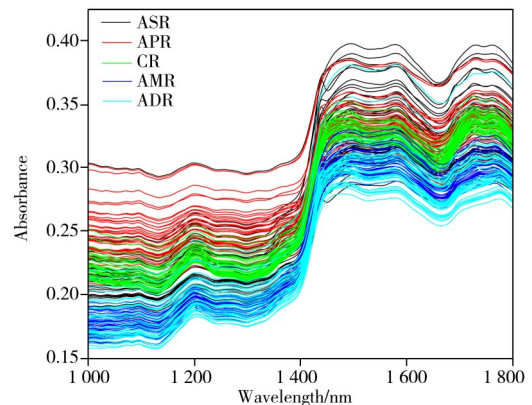


图2 当归及其4种相似品的近红外光谱图

Fig. 2 Near-infrared spectra of ASR and its four similar herbs

$$F1 - score_i = \frac{2 \times Recall_i \times Precision_i}{Recall_i + Precision_i} \times 100\% \quad (3)$$

(4) 准确率(Accuracy):

$$Accuracy = \frac{\sum_{j=1}^n N_{jj}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n N_{ij}} \quad (4)$$

2 结果与讨论

2.1 原始光谱分析

图2展示了当归、独活、川芎、白术和白芷5种中药材共191个样品的近红外光谱图,不同药材的光谱以颜色区分。从图中可见,在1 000~1 799 nm波段范围内,5种药材光谱曲线之间的重叠现象较为严重。这种重叠导致了光谱图谱的混淆,基于原始光谱的目视判别或峰位比对难以有效区分当归及4种相似品药材,需结合机器学习方法提取隐含差异信息。

2.2 主成分分析

采用二维和三维主成分得分图对当归及其相似品进行可视化分析,以直观呈现其聚类趋势。图3显示,川芎样品在PC1和PC2得分图中显著偏离当归、独活、白术和白芷这4种药材,表明PC1方向可能受川芎特有成分影响。然而,除川芎外的4类药材样品点分布高度重叠,表明采用PCA方法对当归及其4种相似品的鉴别效果并不理想,难以实现准确的分类鉴别。

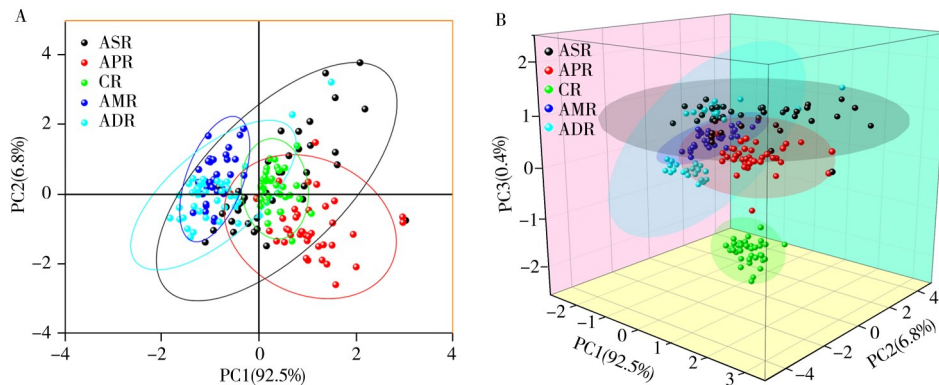


图3 当归及其4种相似品的二维PCA得分图(A)和三维PCA得分图(B)

Fig. 3 Two-dimensional PCA score plot(A) and three-dimensional PCA score plot(B) of ASR and its four similar herbs

2.3 参数优化

主成分(PC)是SIMCA模型中的重要参数,影响最终鉴别效果。因此,在SIMCA建模前,首先需要确定好主成分数。由于SIMCA需要对训练集中每一类光谱数据进行PCA,因此分别考察了当归、独活、川芎、白术和白芷5类样品不同主成分数下SIMCA的预测误差平方和(PRESS)与方差贡献率(Variance contribution),根据PRESS值最小与Variance contribution值最大来确定最佳主成分数。图4为SIMCA建模中当归样品的PRESS值和Variance contribution随主成分数的变化图,随着主成分数的增加,PRESS不断减小,Variance contribution不断增大。当主成分增加到一定值时,PRESS和Variance contribution都趋于稳定,PRESS趋于0,Variance contribution趋于100%。综合考虑,当归样品SIMCA建模的最佳主成分数确定为4。类似地,独活、川芎、白术和白芷样品的最佳主成分数分别为3、5、5和5。

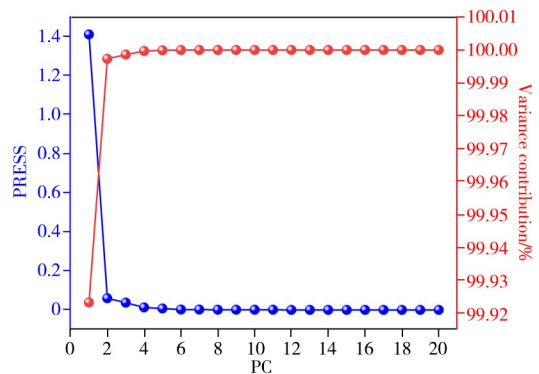


图4 SIMCA建模中当归样品的PRESS和Variance contribution随主成分数的变化图

Fig. 4 Variation of PRESS and variance contribution with the number of principal components for ASR samples in SIMCA modeling

PLS-DA模型中的因子数(LV)是影响模型分类性能的重要参数,可以通过验证曲线选择合适的因子数。在选择因子数时,需要权衡模型的复杂度和性能,其中过多的因子数会导致过拟合,而过少的

因子数则容易导致欠拟合。通常选择能够解释大部分数据方差且分类性能较好的因子数^[22]。从图5可以看出,预测准确率随着因子数的增加呈现逐渐上升的趋势。当因子数为1时,预测准确率相对较低,低于21%。当因子数在1~5范围内时,预测准确率的增长速度较快,当因子数达到5时,预测准确率超过90%。当因子数在6~13范围内时,预测准确率的增长速度变得缓慢。而当因子数超过13后,预测准确率维持在100%。综合考虑模型的复杂度和性能,确定最佳因子数为6。

BP-ANN是一种基于误差反向传播算法训练的多层前馈神经网络,通过计算损失函数的梯度更新权重和偏置参数。本研究构建了包含单隐层的三层前馈神经网络,通过实验优化得到最佳隐含层节点数为10。模型在MATLAB中通过patternnet函数实现,该函数是训练分类问题中常用的神经网络函数,可自动根据输入输出数据构建网络结构。训练时设置好训练次数、训练间隔、学习速率、动量因子等参数,并使用交叉验证防止过拟合。具体参数最优值如表1所示,以此确保BP-ANN模型能够有效学习输入模式与输出类别之间的映射关系,从而实现当归及其4种相似品的精准分类鉴别。

决策树(Tree)数和叶子(Leaf)数是影响RF模型性能的两个参数。增加决策树数可以提高模型的稳定性和准确性,但也会增加计算成本;限制叶子数可以防止过拟合,提高模型的泛化能力,但可能会降低模型的准确性。将决策树从1设置至25,间隔为1,叶子数从1设置至20,间隔为1,共同优化决策树和叶子数两个参数,结果如图6所示。根据模型在训练集上的分类表现并结合模型复杂度,选择最佳决策树为9,最佳叶子数为4。

基于深度学习的CNN架构通常由输入层、特征提取模块(包含卷积层与池化层)及分类模块(包含全连接层与输出层)构成,其中卷积模块可整合批归一化、激活函数等子单元。本研究针对当归及其4种相似品的鉴别需求,通过超参数网格搜索与消融实验验证,最终确定网络结构由输入层、四组级联卷积模块、双全连接层及Softmax分类层构成。如图7所示,特征提取模块的前两组采用“卷积一批归一化-ReLU激活-最大池化”级联结构,其中卷积层的内核大小均为3,步幅均为1,通道数逐层倍增,依次为16、32。池化层的大小和步长均为2,无填充操作。同时在卷积层与ReLU激活函数间插入批归一化层,通过标准化预处理提升梯度流稳定性。后两组卷积模块移除池化层以保留特征图空间分辨率,通道数继续倍增至64、128,维持卷积核大小与步幅的配置,并引入空洞卷积以增强细粒度特征捕获能力。分类模块采用层级降维设计,首先通过全局平均池化层将128通道的特征图压缩为128维向量,随后经神经元数分别为128、5的两个全连接层,实现高级特征到类别空间的映射,最终由Softmax函数输出类别概率分布。

激活函数和隐含层节点数两个参数对ELM的性能至关重要。合适的激活函数可以提高模型的训练速度,而合理的隐含层节点数可以平衡模型的复杂度和泛化能力。在实际应用中,引入MSR进行选择,即相关系数(R)的均值与标准差之比,其中当 R 的均值较大,标准差较小时,MSR值较大,对应的模型性能则越好^[23]。本研究使用Sig、Sin、Hardlim、Tribas和Radbas函数作为激活函数,并将隐含层节点数从1设至100,间隔点设置为5。结果如图8所示,根据MSR最大寻找最优参数,最终激活函数

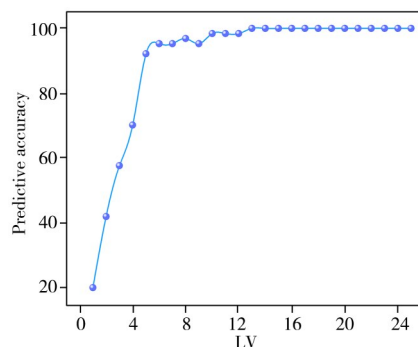


图5 当归及其4种相似品鉴别的PLS-DA建模中训练集的预测准确率随因子数的变化图

Fig. 5 Variation of training set prediction accuracy with the number of factors in the PLS-DA model for discriminating ASR and its four similar herbs

表1 当归及其4种相似品鉴别的BP-ANN主要参数设置

Table 1 Main parameter settings of the BP-ANN for discriminating ASR and its four similar herbs

Number of epochs	Display interval	Learning rate	Momentum factor	Number of hidden layers	Nodes in hidden layer
2 000	50	0.01	0.9	1	10

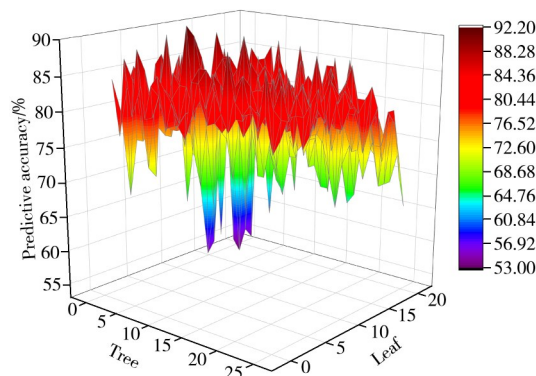


图6 当归及其4种相似品鉴别的RF建模中准确率随决策树数和叶子数的变化图

Fig. 6 Variation of model accuracy with the number of decision trees and leaf nodes in the RF model for discriminating ASR and its four similar herbs

选取 Sig, 隐含节点数为 44。

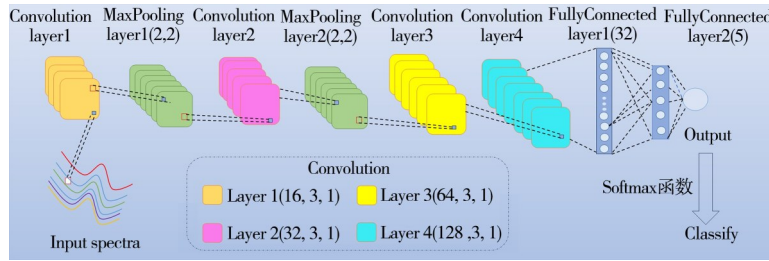


图 7 当归及其 4 种相似品鉴别的 CNN 模型网络结构示意图

Fig. 7 Schematic diagram of the CNN model architecture for discriminating ASR and its four similar herbs

2.4 方法比较

为准确评价 SIMCA、PLS-DA、BP-ANN、RF、CNN 和 ELM 六种方法对当归及其 4 种相似品的鉴别效果, 使用混淆矩阵对预测集的结果可视化, 如图 9 所示, 横坐标表示样品真实类别, 纵坐标表示模型预测类别。当预测标签与真实标签一致时, 样品数量分布于对角线位置, 否则出现在非对角区域。从图 9 中可以看出, ELM 的分类性能最好, 5 类样品均集中于对角线上, 全部被准确分类。PLS-DA 次之, 仅有 3 个样品被错误分类, 准确率为 95.31%。RF 和 SIMCA 的分类准确率均为 90.63%, 分别有 6 个样品错误分类。BP-ANN 和 CNN 的分类性能相对较弱, 分别有 7 个和 8 个样品被错误分类, 准确率分别为 89.06% 和 87.50%。

为进一步评价各模型的性能, 计算了 SIMCA、PLS-DA、BP-ANN、RF、CNN 和 ELM 六种模型在预测集上的召回率、精确率和 F1 分数, 结果如表 2 所示, ELM 在 5 类样品中的各项评价指标均为 100%, 明显高于其他模型。综合各项指标结果, ELM 在本研究中的整体鉴别能力和稳定性优于其他模型。

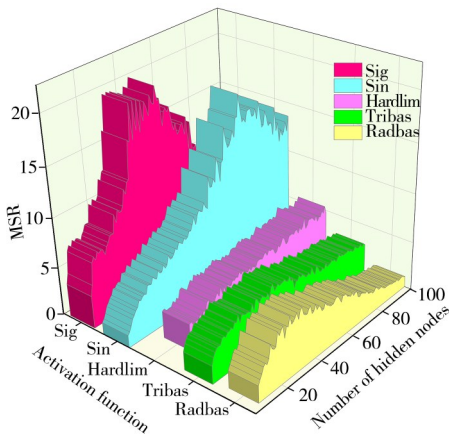


图 8 当归及其 4 种相似品鉴别的 ELM 建模中 MSR 随激活函数和隐含层节点数的变化图

Fig. 8 Variation of MSR with the number of hidden layer nodes across different activation functions in the ELM model for discriminating ASR and its four similar herbs

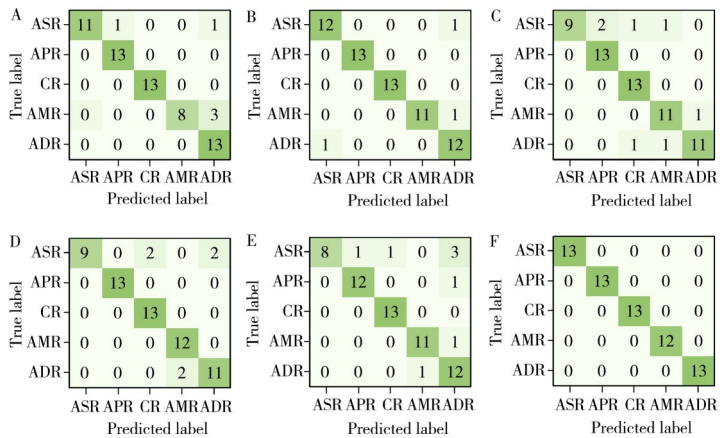


图 9 不同方法对当归及其 4 种相似品鉴别的预测集混淆矩阵

Fig. 9 Confusion matrices of the prediction set for different methods in discriminating ASR and its four similar herbs

A. SIMCA, B. PLS-DA, C. BP-ANN, D. RF, E. CNN, F. ELM

表 2 不同模型在当归及其 4 种相似品预测集上的分类评价指标比较

Table 2 Comparison of classification evaluation metrics for different models on the prediction set of ASR and its four similar herbs

Evaluation metric	Component	SIMCA/%	PLS-DA/%	BP-ANN/%	RF/%	CNN/%	ELM/%
Recall	ASR	85	92	69	69	62	100
	APR	100	100	100	100	92	100
	CR	100	100	100	100	100	100
	AMR	67	92	92	100	92	100
	ADR	100	92	85	85	92	100
Precision	ASR	92	92	100	100	100	100
	APR	92.3	100	87	100	92	100
	CR	100	100	87	87	93	100
	AMR	100	100	85	86	92	100
	ADR	100	100	85	86	92	100

(续表2)

Evaluation metric	Component	SIMCA/%	PLS-DA/%	BP-ANN/%	RF/%	CNN/%	ELM/%
F1-score	ADR	76	86	92	85	71	100
	ASR	88	92	82	82	76	100
	APR	96	100	93	100	92	100
	CR	100	100	93	93	96	100
	AMR	80	96	88	92	92	100
	ADR	87	89	88	85	80	100

3 结 论

本研究将近红外光谱技术与机器学习方法相结合,对当归及其4种相似品(独活、川芎、白术、白芷)进行了系统鉴别。PCA得分图分析结果表明,仅川芎样品呈现出一定的聚类趋势,其余样品点分布交错,难以实现有效区分。在进一步构建的6种机器学习模型中,ELM模型在召回率、精确率和F1分数等指标上表现最佳,其模型预测集准确率达到100.00%,高于PLS-DA(95.31%)、SIMCA和RF(均为90.63%)、BP-ANN(89.06%)及CNN(87.50%)。此外,本研究所建立的近红外光谱结合ELM模型具有检测速度快、操作简便和无损分析等优势,具备在中药材流通环节、市场监管及生产企业质量控制中的应用潜力。未来可进一步扩大样本来源、增加批次多样性,并结合在线检测系统,实现当归及其相似品的快速现场鉴别,为中药材质量安全监管提供技术支撑。

参考文献:

- [1] Bian X H, Liu Y X, Xie J Q, Zhao C Y, Tan X Y, Tian W L. *J. Appl. Res. Med. Aromat. Plants*, **2025**, 46: 100640.
- [2] Zhi X D, Ren C Z, Li Q R, Xi H Q, Li D, Chen Q L, Lv X F, Gao X, Wu X, Wang C L, Jiang B, Mao Z N, Jiang H G, Liu K, Zhao X K, Li Y D. *Biomed. Pharmacother.*, **2024**, 173: 116429.
- [3] Shen J, Qin H, Li K K, Ding H Q, Chen X H, Peng M Y, Jiang X, Han Y T. *Int. Immunopharmacol.*, **2024**, 133: 112025.
- [4] Huang H H, Deng Y R, Chen S S, Li Z Y, Li X M, Sun J H, Hao L Y, Yu Z Y, Wang A A, Li J L, Huo H R, Liu G M, Li H M. *Sci. Tradit. Chin. Med.* (黄瀚辉, 邓玉荣, 陈石生, 李宗源, 李晓敏, 孙建辉, 郝莉雨, 于泽玥, 王奥奥, 李建良, 霍海如, 刘桂敏, 李洪梅. 中医药科学), **2024**, 2(1): 29-36.
- [5] Ling Y, Zhang Y L, Xu Y, Zheng J H. *Northwest Pharm. J.* (凌云, 张永林, 徐杨, 郑俊华. 西北药学杂志), **1999**, (6): 250-251.
- [6] Du C W. *Guangming J. Chin. Med.* (杜才伟. 光明中医), **2020**, 35(7): 1112-1114.
- [7] Wang S J. *Guangming J. Chin. Med.* (王世静. 光明中医), **2021**, 36(10): 1733-1734.
- [8] Lu J, Xiang B R, Liu H, Xiang S Y, Xie S F, Deng H S. *Spectrochim. Acta A*, **2008**, 69(2): 580-586.
- [9] Bian X H, Liu Y, Wang Y, Zhang Q, Zhang Y. *J. Instrum. Anal.* (卞希慧, 刘雨, 王瑶, 张强, 张妍. 分析测试学报), **2025**, 44(2): 229-237.
- [10] Zhou Q, Sun S Q, Leung H W. *Spectrosc. Spectral Anal.*, **2003**, 23(3): 509-511.
- [11] Li S, Li X R, Wang G L, Nie L X, Yang Y J, Wu H Z, Wei F, Zhang J, Tian J G, Lin R C. *Pharm. Biomed. Anal.*, **2012**, 70: 605-608.
- [12] Liu S, Liu H G, Li J Q, Wang Y Z. *J. Chemom.*, **2025**, 39(1): e3641.
- [13] Zhu S S, Zhong Q S, Yan D H, Yan Z J, Chen S, Yao Y D, Zhou C. *Anal. Lett.*, **2024**, 57: 1-15.
- [14] Zhang C, Su J H. *Acta Pharm. Sin. B*, **2014**, 4(3): 182-192.
- [15] Liu X S, Shi C S, Cheng Y Y, Qu H B. *Chin. J. Anal. Chem.*, **2007**, 35: 1483-1486.
- [16] Liang L J, Mi Y J, Zhou S H, Yang A J, Wei C Y, Dai E L. *Front. Pharmacol.*, **2024**, 15: 1403227.
- [17] Poon T Y C, Ong K L, Cheung B M Y. *J. Diabetes*, **2011**, 3(3): 184-200.
- [18] He T Y, Shi Y B, Cui E Z, Wang X L, Mao C Q, Xie H, Lu T L. *Microchem. J.*, **2023**, 195: 109438.
- [19] Ma H, Pan H Y, Pan D Y, Ni H F, Feng X J, Liu X S, Chen Y, Wu Y J, Luo N. *Spectrochim. Acta A*, **2020**, 242: 118792.
- [20] Tong A X, Tang X J, Liu H B, Gao H H, Kou X F, Zhang Q. *ACS Omega*, **2023**, 8(13): 12418-12429.
- [21] Bian X H, Li S J, Fan M R, Guo Y G, Chang N, Wang J J. *Anal. Methods*, **2016**, 8(23): 4674-4679.
- [22] Han M H, Yu X, Peng J B, Yang C B, Cao Z, Qi J H, Yuan X. *Spectrosc. Spectral Anal.* (韩明宏, 于欣, 彭江波, 杨超博, 曹振, 亓金浩, 袁勋. 光谱学与光谱分析), **2025**, 45(4): 947-952.
- [23] Bian X H, Zhang C X, Tan X Y, Dymek M, Guo Y G, Lin L G, Cheng B W, Hu X Y. *Anal. Methods*, **2017**, 9(20): 2983-2989.

(责任编辑: 盛文彦)